



ACTIVITATS

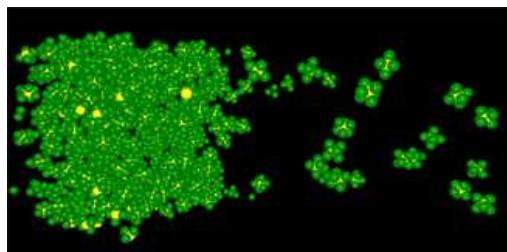
TESIS

ENTREVISTES

AVENÇOS

A FONS

QUÍMICA



TESIS

Nou mètode per mesurar un inductor de proteïnes recombinants

El desenvolupament d'un nou mètode analític per mesurar un inductor de proteïnes recombinants per tal de reduir-ne la quantitat necessària, per així obtenir més proteïna, ha estat la principal aportació de la tesi doctoral: "Study of transport mechanisms involved in IPTG uptake by E.coli in high cell density cultures" d'Alfred Fernández Castañé defensada a la UAB.

[+]

AVENÇOS

Llengües BioElectròniques en l'anàlisi dels polifenols del vi

El desenvolupament d'una llengua BioElectrònica amb característiques similars al nostre sentit del gust, amb una xarxa neuronal artificial que processa la informació i capaç de detectar i quantificar els polifenols presents al vi, paràmetre important en la indústria vinícola, és l'eix central d'una investigació del Departament de Química de la UAB.

[+]

AVENÇOS

Sota la lupa: la reacció dels bacteris a les nanopartícules

L'Institut Català de Nanotecnologia i el Departament d'Enginyeria Química estudien, per primer cop, l'efecte nociu que les nanopartícules, cada vegada més presents en articles quotidians com detergents o cosmètics, poden tenir en comunitats bacterianes essencials a les depuradores d'aigua. Aquest és un pas inicial per entendre l'impacte que la nanotecnologia pot tenir sobre els bacteris.

[+]

ENTREVISTES

Sixto Malato, expert en tecnologies per descontaminar aigua amb energia solar

"La implantació d'aquestes tecnologies ha de venir de la mà del desenvolupament d'estratègies de gestió de l'aigua a mig i llarg termini"

[+]

02/2006 - **Un model molecular que perfecciona processos industrials**

Aconseguir que un procés industrial sigui òptim, segur i net és una mica complex. Depèn de diversos factors tant externs com els que s'escapen als nostres ulls. Investigadors de la UAB intervenen en aquest nivell i segueixen de prop els fenòmens físico-químics dels materials industrials. En concret, intenten crear un model molecular que prevegi l'activitat del SF6, un gas sintètic de molta utilitat a la indústria.

Referències

Article: Olivet, A; Duque, D; Vega, LF, "Sulfur hexafluoride's liquid-vapor coexistence curve, interfacial properties, and diffusion coefficients as predicted by a simple rigid model", JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 123 (19): 94508-94508 NOV 15 2005.

El grup de simulació molecular de l'ICMAB-CSIC, situat al campus de la UAB, acaba de publicar un treball de recerca sobre l'aplicació de la dinàmica molecular a l'estudi de la molècula de hexafluorur de sofre. L'hexafluorur de sofre o SF6 és un gas sintètic. L'estructura de la molècula és octaèdrica, amb sis àtoms de fluor situats simètricament entorn a un àtom central de sofre. SF6 té moltes aplicacions a l'indústria degut a la seva elevada estabilitat química i també per les seves propietats dielèctriques. D'entre el 90 i 95% de la seva producció es fa servir a l'indústria elèctrica i com gas aïllant en dispositius electromecànics i línies de transmissió. SF6 es fa servir, tanmateix, en processos d'obtenció d'alumini i magnesi, en la manufactura de semiconductors i d'altres aplicacions més sofisticades, com ara, aïllant termoacústic de finestres, i solvent inert en reaccions en fluids supercrítics. Per últim, SF6 es fa servir en tecnologia mèdica, per exemple, com a agent de contrast en ultrasonografies i con a gas inert en operacions oftalmològiques i d'altres tractaments mèdics.

Olivet, Duque i Vega van presentar en aquest treball simulacions de dinàmica molecular per a comprovar la precisió d'un model rigid per a predir l'equilibri líquid-vapor i la tensió superficial d'aquest compost, comparat amb dades experimentals. La mateixa eina es va fer servir per a obtenir els coeficients de transport del compost a pressió atmosfèrica i a diferents temperatures. Les conclusions més rellevants d'aquest estudi són que per a obtenir prediccions quantitatives de les propietats termodinàmiques del SF6 és imprescindible considerar un model flexible, mentre que les propietats dinàmiques són menys sensibles a la vibració dels àtoms en aquestes condicions. El grup està treballant en el desenvolupament d'un model més fiable per proporcionar prediccions quantitatives de diverses propietats termodinàmiques, de transport i elèctriques.

L'interès d'aquest estudi està relacionat amb la necessitat de desenvolupar eines fiables per avançar en l'enteniment de la relació entre les propietats microscòpiques d'un compost i el seu comportament macroscòpic. De fet, els models moleculars són necessaris, i molts cops, imprescindibles, per entendre certs fenòmens físico-químics que tenen lloc en molts processos industrials, i poder així ajudar a la seva optimització, al seu control més segur, i a fer processos ambientalment més nets.

Dra. Lourdes F. Vega

Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB)
Universitat Autònoma de Barcelona

lvega@icmab.esSi tens propostes: premsa.ciencia@uab.es

E-mail per rebre el nostre butlletí

Enviar